生命システムの記述基盤と，生命の幾つかの特徴の定式化

ＮＥＣ基礎研究所　飯田一浩　〒３０５つくば市御幸が丘３４番地　iida@exp.cl.nec.co.jp

１．はじめに

生命の基本的システム構造は何だろうか？どんな法則で生じたのだろうか？現存する生物以外の存在様式はあり得るだろうか？－ 即答は不可能だが，解に至る道は必ず有る．筆者は（１）物理システムの一般的表現の上に（２）生命が満たすべき必要条件を重ねてゆき（３）それらの条件を満たすシステムを設計し，テストするという方法をとっている．以下では，この方法で多少解ってきたことを述べる．

２．生命は生じうるか？

生命の起源は，全体の中に特別な性質をもつ部分系が生じることに他ならない．しかしそれが“生じる”ことを，どう記述すべきかは自明でない．その存在領域（ドメインD）を初期条件に明示的に書いたのでは，生じたとは言えない．

筆者は，D は或る検出機構によって後付けに決まると考える．本来，系自体に区切りは無いという前提に立てば，Dの区別は主観，あるいは基準の導入に他ならない．D の生成や消滅があり得るには，部分を区切る基準の存在が不可欠である．その検出基準の具体的内容は棚上げにして関数Ψ に代表させる時，D は形式的に $D=\{\,\mathbf{r}\,|\,\Psi[\xi,\mathbf{r},\theta_t]\geq\delta\,\}$ ---(1) と書ける（従ってΨ には記号Dが陽に含まれてはならない）．$\mathbf{r}$は３次元座標，ξ は検出の対象となる物理量，θ_t はΨ の値の確定に必要な時間，δは閾値である．この枠組みなら，ξの変化に伴ってDの生成消滅があり得る．Dを生命の基本システムのそれと考える時，Ψ は生命の必要条件群を表すことになる．

３．生命システムを記述するには？

生命の基本システムの物理スケールは，最も小さい原核細胞（*Micoplasma* 属~ 100 nm）よりも小さい 10 nm のオーダーにあると予想される．この小さな部分系の振る舞いを記述するために，確率流れ$\mathbf{j}$（図１．付録A）による遷移表現を導入する．

$\mathbf{j}$を決めると現象論的に局所密度行列$\underline{\hat{\rho}}_r(\mathbf{r},t)$（付録B）が定まるので，我々が設計するシステムの遷移が，どのような物理変化を伴うかをモニターできる．これにより，その遷移が自然界で生じうるか否か，背後にある法則は何かを議論できる．図１に示す５種類の素過程を代表する確率流れを決めると，直ちにシミュレーションが可能なだけでなく，$\underline{\hat{\rho}}_r$が得られ，種々の物理化学指標$\xi\{\underline{\hat{\rho}}_r\}$，例えば，エントロピー密度 $s(\mathbf{r})\overset{\text{def}}{=}-\mathrm{Tr}\,\underline{\hat{\rho}}_r\log\underline{\hat{\rho}}_r=-\sum_n^N\rho_0 P\log P$ 等が導かれる（付録C）．

こうして生命の基本システムを探す我々が記述すべきは，主に，確率流れで書く微小な点システムの振る舞いと，生命の必要条件群を代表するΨ の二点となる．

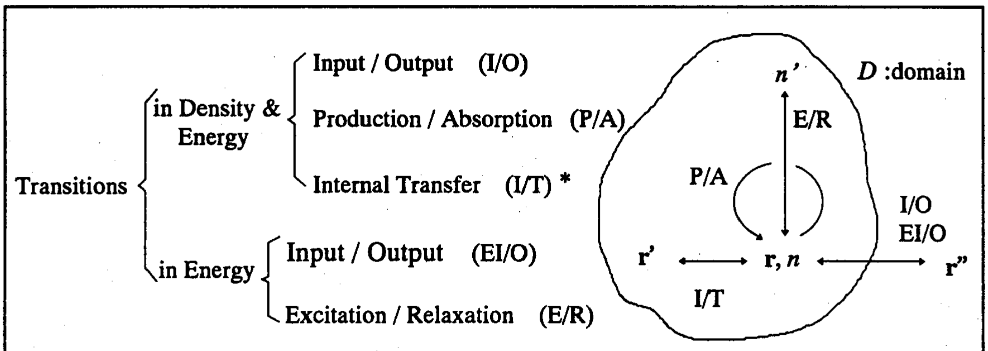

図１．任意の部分系に関する素過程の数え上げ　系の遷移には，粒子密度ρの変化とそれに伴うエネルギー量の同時変化，そしてエネルギー状態のみの変化とがある．同時変化はDの境界を横切るρの出入り **I/O**，湧きだしなどの境界条件に対応するD内でのρの生成消滅 **P/A**，D内のρ分布の変化 **I/T**（＊：局所密度行列に対応する点システムの場合を除く）に，そしてエネルギー状態のみのそれは，エネルギーの出入り **EI/O** と，化学反応等に伴うD内のエネルギー状態変化 **E/R** とに分けられる．

4．生命の基本システムの特徴 [1]

原始的な必要条件を３つだけ挙げる．

1）検出可能性 生命の基本システムは，Ψ で正しく検出されねばならない．従って，ε を Ψ による ξ の許容計量誤差とするとき，$\left|\dot{\xi}\{\underline{\hat{\rho}}_r\}\right| \le \varepsilon/\theta_t$ ---(2) である．生命系の振る舞いを記述する確率流れは，$\underline{\hat{\rho}}_r$ を介して (2) を満たす．

2）準安定性 非平衡な環境の下では，外乱への抵抗性無しに生命はあり得ない．この性質は，系の準安定性を意味する．我々は設計者の立場にあるのでリアプノフ関数 L として，例えば EI/O（図１）による波動関数のズレ$(\ \delta|n_r\rangle\ )^2$を選ぶことができる．この時，$|n_r\rangle$の位相へのインパルス的外乱に対する準安定条件は，$\dot{L} = Q\dot{a} \le 0$---(3) と書ける．$\dot{a}$ は波動関数の位相変化で，確率流れの関数である．Q は外乱による位相の偏差 a の三角関数を含むため，(3)を満たすように確率流れ $\mathbf{j}, J$ を選ぶと図２の例のようなアトラクタ列を持つ系が導かれる．このアトラクタ列は，アキュムレータとして外乱の履歴を保持できる可能性がある．

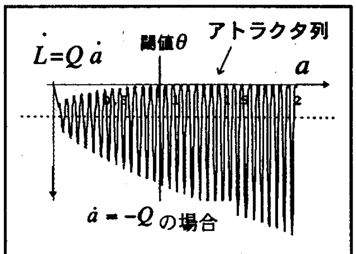

図２．準安定な微小系のアトラクタ列

3）自由エネルギーの自発的増加 生命システムの自由エネルギー保持量は，分裂等を通じて増加する．この性質をD と無関係に書くと，$\langle\dot{f}(\mathbf{r})\rangle \ge 0$---(4) となる．$f(\mathbf{r})$は位置$\mathbf{r}$での自由エネルギー密度で，$\underline{\hat{\rho}}_r$ から得られる．$\langle\ \rangle$はθ_t のスパンの時間平均である．生命系の確率流れは$\underline{\hat{\rho}}_r$ を介して(4)を満たす．

5．おわりに

生命の基本システム構造を必要条件で絞り込む方法について述べた．“生命とは何か”という哲学的問いに答えるには，構成と試行錯誤による方法と同時に，必要条件というロジックで網を打つことが不可欠と考える．

---

1 より詳しい内容については気軽にご連絡下さい．

[1] *Foundations of Statistical Mechanics Vol.I*, W.T.Grandy,D.Reidel Publishing Co., p. 92, 1987.
[2] *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Process Vol. 1*, Zubarev, Morozov, Röpke, Akademie Verlag, p.101, 1996.

付録A エネルギー状態間の遷移も流れと呼び，J と書いた．例えば，流れ $J(\mathbf{r};n\rightarrow n')_{EI/O}$ は，EI/O（図１）により位置 $\mathbf{r}$ のエネルギー状態密度 $P_e(\mathbf{r},n)$が単位時間に状態 n から n'にどれだけ移行するかを表す．なお，粒子の性状は初め特定せず質点と捉え，逆に必要条件から絞り込む方針である．

付録B 例として一種類の粒子からなる系を考える．その密度行列を $\hat{\rho}$（ハットは演算子の意），ドメインはΩとする．局所密度行列を $\underline{\hat{\rho}}_r(\mathbf{r}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\hat{\rho}_r$ で定義する時，$\hat{\rho} = \int_\Omega d^3\mathbf{r}\ \underline{\hat{\rho}}_r$．$\hat{\rho}_r$ は位置 $\mathbf{r}$ で指定される局所ハミルトニアン $\hat{H}(\mathbf{r})$ （文献[2]）に対する通常の密度行列である．

$\hat{\rho}_r$ の要素は確率流れ $\mathbf{j}, J$ から現象論的に決まる．$\langle\mathbf{r}|\hat{\rho}_r|\mathbf{r}\rangle$ （$=\mathrm{Tr}\,\underline{\hat{\rho}}_r$）を $\sum_n^N P_e(\mathbf{r},n)A(\mathbf{r},n)\rho_0(\mathbf{r}|n)$ （ρ_0は$\langle\mathbf{r}|n_r\rangle\langle n_r|\mathbf{r}\rangle$，$|n_r\rangle$は$\hat{H}(\mathbf{r})$の n 番目の固有ベクトル，Nは固有状態の総数，P_e は状態密度，A は粒子密度変化に伴う補正項 ）と書く時，

$$E(\mathbf{r},n)\dot{P}_e = \sum_{n'\neq n}^N \{E(\mathbf{r},n') - E(\mathbf{r},n)\}\{ J(\mathbf{r};n\rightarrow n')_{EI/O} + J(\mathbf{r};n\rightarrow n')_{E/R} \},$$

$$\dot{A} = J(\mathbf{r};n\rightarrow n)_{I/O} + J(\mathbf{r};n\rightarrow n)_{P/A},$$

（$\mathbf{j}, J$ の下付添え字は，それぞれの素過程で得られたことを示す．$E(\mathbf{r},n)$は n 番目のエネルギー固有値である）なる関係から P_e，Aが得られ，さらに $\hat{H}(\mathbf{r}) = \hat{P}^2/2m + \hat{V} + \hat{M}$ と考える時，$\mathbf{j}, J$ と所与の外部ポテンシャルVから，粒子の相互作用ポテンシャル M，および運動量 p が得られる．

付録Ｃ $|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|^k = |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|$ （k は自然数），$f(|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\hat{\rho}_r) = |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|f(\hat{\rho}_r)$ （f は演算子の関数 $\in C^\infty$） なる関係を活用する． 平衡系での定義と同様に，エネルギー密度 $u(\mathbf{r}) = \mathrm{Tr}\,\underline{\hat{\rho}}_r\,\hat{H}(\mathbf{r})$，自由エネルギー密度 $f(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) - s(\mathbf{r})\tau(\mathbf{r})$等が得られ，温度$\tau(\mathbf{r})$ （$k_B T(\mathbf{r})$）もエントロピー最大原理から導かれる（文献[1]）．(実測値は，これらの密度を平均自由行程規模の体積で平均した値に対応する．)